

# Концептуальные системы химии. Структурные и кинетические теории

**В. И. КУЗНЕЦОВ, А. А. ПЕЧЕНКИН**

Проблема систематизации теоретического знания современной химии, тесно связанная с изучением особенностей познания различных структурных уровней вещества, является одной из наиболее актуальных философских проблем естествознания. От ее решения зависит очень многое, и в первую очередь определение реальных границ «физикализации» и «биологизации» химии, знание которых позволит рационально сочетать теоретические и экспериментальные исследования. С проблемой систематизации связано определение места квантово-химических теорий, на которые вот уже свыше сорока лет возлагаются надежды как на фундамент построения новой химии, обещающей в совершенстве управлять процессами изменения вещества, но которые до сих пор пока не оправдали всех ожиданий. С вопросами о соотношении химических теорий связано, наконец, выяснение общих закономерностей развития химических наук, следовательно, и выяснение тенденций в изменении их структуры. А это имеет основополагающее значение для науковедения, и в частности для рационального построения сети химических научных учреждений.

К сожалению, до недавнего времени вопросам соотношения химических теорий уделялось мало внимания. Они являлись прерогативой преимущественно составителей учебников, и потому даже классификация теорий химии основывалась скорее на педагогических принципах, чем на логических. В то же время задача, которую Ф. Энгельс связал с необходимостью «развить... науку в ее собственной, внутренней связи», требует выявления основных понятий научных теорий и исследования связей между ними. Такой анализ не может не основываться на обобщении данных истории науки, так как именно в ходе исторического исследования обнаруживаются те тенденции научного мышления, с которыми связаны формирование и «переходы» понятийных структур.

Для решения вопросов о соотношении теорий химии теперь созрели и необходимые условия: за последнее время появились историко-химические работы, в которых впервые с более или менее исчерпывающей полнотой освещены вопросы генезиса и развития теорий периодичности (Б. М. Кедров, Д. Н. Трифонов, А. А. Макареня, Н. А. Фигуровский), структурных теорий (Г. В. Быков, Ю. С. Мусабеков, М. Г. Фаерштейн), кинетических и каталитических теорий (В. И. Кузнецов, Н. И. Родный, Ю. И. Соловьев). Уже на основе этих работ можно показать, что химия складывается по крайней мере из четырех концептуальных систем: а) теорий периодичности, на основе которых формируются теории валентности или валентных возможностей свободных атомов; б) структурных теорий, включающих как классические, так и квантовые представления о строении молекул; в) кинетических теорий, к которым относятся, кроме феноменологической кинетики, теория переходного состояния, теория цепных реакций, каталитические теории и г) теорий

эволюционного катализа, в основу которых положено понятие химической эволюции, до недавнего времени почти не функционировавшее в химии. Общим для всех этих систем является то, что они направлены на решение генеральной, непреходящей проблемы химии, которую принято называть проблемой реакционной способности химически индивидуальных веществ. Специфика же каждой из этих четырех концептуальных систем состоит в различии уровня познания факторов, обуславливающих свойства и реакционную способность вещества.

В настоящей статье преследуется цель показать методологические основы соотношения лишь структурных и кинетических теорий как двух концептуальных систем, почти всецело определяющих состояние современной химии. Вопрос этот частично рассматривался одним из нас<sup>1</sup> в аспекте принципа соответствия. Его можно изучать также в плане отражения тех скачков в природе вещества, о которых говорил М. Э. Омеляновский в связи со схемой «замкнутых» физико-теоретических систем В. Гейзенберга<sup>2</sup>. Мы хотели бы здесь проследить прежде всего те логические закономерности, которые проявляются при переходе от структурных теорий к кинетическим. Историко-химические исследования дают основания полагать, что этот переход обусловлен достижением предельных возможностей понятия структуры на высших этапах его эволюции. Если это так, то становится весьма интересной задача исследования путей перехода от этого понятия к какому-то новому, которое могло бы стать аналогом или скорее гомологом первого.

### Структурные теории химии и категория структуры

Как сила, так и слабость структурных теорий сосредоточена в понятии «структура» — смком и глубококом, но все же, видимо, далеко не таком универсальном, чтобы описать процессы химических превращений. Это понятие претерпело значительную эволюцию в химии. В конце концов оно «переросло» самое себя, дало ростки новых, более общих химических представлений и вошло в эти представления в качестве составной части, очертив границы структурной химии как относительно замкнутой концептуальной системы. Каким же образом эволюционировало понятие структуры в химии?

Генезис этого понятия неотделим от эволюции представлений о химическом составе вплоть до того момента, когда понятие состава далее не могло служить объяснению свойств вещества. Этот момент подробно освещен в работе Б. М. Кедрова «Атомистика Дальтона» (1949), и поэтому здесь остается лишь подчеркнуть гомологический характер связи этих двух понятий. Характерно и то, что понятие структуры в химии появилось не сразу: в течение трех десятков лет после работ Дальтона, включившего структурный фактор в теоретический аппарат химии, термины «сорасположение», «конституция», «структура» и «состав» часто были синонимами.

В теории радикалов понятие структуры лишь очень немногим отличалось от понятия состава, но уже тогда (1820—1830 гг.) оно было прогрессивным в той мере, в какой объясняло различие в свойствах веществ одинакового состава — полимеров и изомеров. В 1840-х годах Ш. Жерар прочно связал это понятие с понятием молекулы как унитарной системы, то есть единой химической микросистемы, которую он считал носителем свойств данного химического индивида. И тогда произошло резкое отграничение понятия состава как множества самостоятельных элементов от понятия той целостности вошедших в мо-

<sup>1</sup> См В. И. Кузнецов Эволюция представлений об основных законах химии. М., 1967, гл. VII.

<sup>2</sup> См. М. Э. Омеляновский. Послесловие к книге В. Гейзенберга «Физика и философия». М., 1963, стр. 198.

лекулу элементов, которая стала главным атрибутом химического соединения. Этот любопытный образец, если так можно выразиться, раннего системного подхода не прошел мимо Маркса и Энгельса<sup>3</sup>, которые применили его в качестве аналогии, чтобы показать различие между суммой индивидуальных сил и теми же силами, но скооперированными в единую целостность.

Временным отступлением от этих идей Жерара следует считать не вполне последовательные взгляды А. Кекуле и А. С. Купера, ставшие знаменем той структурной химии, с которой связывают классический аддитивный способ мышления. Понятие структуры в теориях Кекуле и Купера выражается через жесткие валентные схемы с равноценными парными межатомными связями, образованными за счет взаимного насыщения «единиц сродства».

В противоположность аддитивному методу описания химических соединений А. М. Бутлеров ввел такое понятие структуры, которое вновь отражает целостность, или «унитарность», химической системы, взаимное влияние всех атомов, составляющих такую систему, а отсюда неравноценность распределения сродства по химическим связям, то есть различную их реакционную способность. Бутлеровское понятие структуры как «распределения действия сил сродства» уже воплощало в себе рациональные идеи динамизма, явившиеся результатом распространения «великой основной мысли, что мир состоит не из готовых, законченных *предметов*, а представляет собой совокупность *процессов*, в которых предметы, кажущиеся неизменными... находятся в непрерывном изменении...»<sup>4</sup>.

Фактически Бутлеров выразил в своем понятии структуры то философское содержание, которое стало очевидным только в самое последнее время. Категория структуры выражает устойчивость системы по отношению к различным внешним и внутренним воздействиям. Ее определяют как «инвариантный аспект системы» или как устойчиво сохраняющуюся упорядоченность элементов, их отношений и целостных свойств системы<sup>5</sup>.

С достижением такой фазы эволюции понятия структуры состав оказывается лишь одним из аспектов структуры. Структура указывает на элементы системы — сохраняющиеся в ходе различных ее изменений единицы состава. Но, кроме элементов, структура отражает принцип связи последних в некоторое целостное образование, обнаруживающее свои свойства в процессе внешних взаимодействий. «Структура», таким образом, замыкает систему категорий «состав», «свойство», с которых начиналось формирование структурных теорий<sup>6</sup>:



Во всех учебниках можно прочесть о тех преобразованиях химии, которые произошли в связи с появлением структурных представлений. С тех пор химия превратилась из науки аналитической в науку преимущественно синтетическую. Химики заговорили о триумфальном шествии синтеза. Их девизом стало утверждение: «Дайте нам воду, воздух

<sup>3</sup> См. К. Маркс, Ф. Энгельс. Соч., т. 20, стр. 130; т. 23, стр. 318.

<sup>4</sup> К. Маркс, Ф. Энгельс. Соч., т. 21, стр. 302.

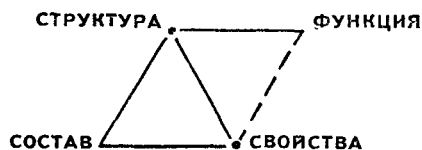
<sup>5</sup> См. статьи: Н. Ф. Овчинников. Категория структуры в науках о природе; М. Ф. Веденов и В. И. Кремьянский. Специфика биологической структуры. В сб. «Структура и формы материи». М., «Наука», 1967, стр. 13, 616.

<sup>6</sup> См. Г. В. Быков. «Труды Института естествознания и техники АН СССР», т. 20. М., 1958, стр. 165; Б. М. Кедров. Общий ход познания вещества. «Вопросы философии», 1965, № 4.

и уголь (то есть элементы водород, кислород и углерод), и мы сможем получить сколь угодно сложные вещества». Однако по мере совершенствования методов синтеза столь заманчивые цели оказывались все более далекими: на пути получения материалов с заданными свойствами возникало все больше и больше помех. И хотя достижения синтетической химии продолжают умножаться (в 1950-х годах получен стопроцентный аналог натурального каучука; в 1960-х годах синтезирован ряд сложнейших витаминов и гормонов, получен простейший белок), сейчас химики уже ясно представляют себе, что знание лишь одной структуры вещества отнюдь не гарантирует успешного решения задачи получения веществ с необходимыми свойствами. Поэтому химики приступили к детальному исследованию процессов превращения вещества, включив в орбиту химических исследований задачи кинетического характера.

Очень важно подчеркнуть при этом, что эволюция понятия химической структуры вызвала изменения и в понятии свойств. Здесь произошла своеобразная дивергенция: наряду с прежним представлением о свойствах, совокупность которых характеризует качество вещества, появилось новое понятие — о реакционной способности как весьма своеобразной функции части и целого. Это новое понятие представляет собой и конкретизацию и одновременно расширение представления о свойствах. Его генезис напоминает происхождение понятия структуры с таким же постепенным отпочкованием от материнского понятия. Первоначально под реакционной способностью подразумевали то же, что вкладывалось в понятие химических свойств. Происходило, таким образом, первое рождение нового понятия путем дифференциации материнского понятия — «свойств» вообще. Затем под реакционной способностью стали подразумевать функцию не только вещества в целом, но — соотносительно представлениям о структуре — также и его фрагментов: отдельных атомов, атомных групп и связей в молекуле. Эта фаза свидетельствует уже об эмансипации нового понятия от материнского. И, наконец, теперь под реакционной способностью понимают функцию как вещества, так и его фрагментов, которая оценивается, однако, уже не только по структурным параметрам, но и по кинетическим: по величине энергии активации и по направлению реакции, которое обуславливается всей совокупностью реагирующих веществ. Так объяснение реакционной способности становится проблемой не столько структурных теорий, сколько кинетических.

Структурные теории, следовательно, не только разрешали химические проблемы, но и ставили новые. Категория структуры немислима без категории функции. Если структура отражает формы устойчивости в системе, то функция (в химии — реакционная способность) фиксирует различные способы изменения этой системы, направленность этих изменений. А эти характеристики требуют уже выхода за пределы структурных представлений. Категориальная схема вследствие этого расширяется:



В настоящее время показано, что любой химический индивид *A* обладает двойственной функцией: он может обнаружить в процессе химической реакции противоположные свойства: и кислоты и основания, и окислителя и восстановителя, и катализатора и ингибитора, и промотора и яда. Но он обнаруживает только одно из двух противо-

ложных свойств, что зависит, во-первых, от его состава и структуры, а во-вторых, в равной степени от природы (состава и структуры) второго индивида *B*, вступающего в химическое взаимодействие с ним. А так как в системе реагирующих веществ, кроме сореагента *B*, присутствуют еще стенка сосуда, примеси, растворители, специальные добавки и т. д., то каждое из этих веществ может оказать на реагент *A* такое же воздействие, как и сореагент *B*.

Следовательно, каждый участник химического процесса, представленный определенной химической системой — молекулой, комплексом или системой стенок сосуда и растворителя, — становится элементом, или подсистемой, более сложной, но тем не менее единой системы реагирующих веществ, которую иногда называют кинетическим континуумом. Эта система обладает новыми закономерностями, связывающими ее элементы и определяющими ее изменение вплоть до выхода продуктов реакции.

Исследование такого рода систем не укладывается в рамки структурных представлений. Структурный подход в лучшем случае дает лишь статический срез процесса или момент дискретности его развития<sup>7</sup>. Правда, и это важно подчеркнуть, из структурного подхода, как свидетельствуют работы, например, школы Бутлерова, непосредственно следует представление о механизме реакций. Под механизмом химической реакции понимают последовательность ее элементарных стадий, то есть актов превращений реагирующих веществ. Это понятие фиксирует, в сущности, диахроническую структуру химического процесса<sup>8</sup>. Но механизм реакций еще не объясняет всех свойств кинетической системы: для этого необходимо знать принципы, которые управляют течением элементарных стадий.

Для развития химии в послебутлеровский период характерна широкая экспансия структурного подхода: структурные теории стремились охватить своими представлениями возможно большее число видов веществ. Однако и на этом пути у них возникли препятствия. Бутлеров строго применял понятие химического строения, или структуры, там, где прилагалось понятие «определенной химической частицы», то есть молекулы. Он предостерегал, что «распространять понятие химического строения на все вещества без исключения — невозможно, точно так же как невозможно распространять на них и понятие о химической частице»<sup>9</sup>. Когда химики приступили к исследованию растворов и металлических сплавов — веществ, которые стали называться соединениями переменного состава, структурные представления показали свою ограниченность. Между тем к таким соединениям относится огромная масса веществ: интерметаллические системы, или бертоллиды Н. С. Курнакова; бертоллиды «в широком смысле слова» Б. Ф. Ормонта, в число которых входят все твердые фазы переменного состава, в частности окислы металлов, гидриды, соли и т. д. Сюда относятся все поверхностные соединения. Классическим типом веществ бертоллидной формы являются жидкие растворы, носителями свойств которых являются сольваты как сложные химические системы взаимодействия между а) частицами растворенного вещества, б) молекулами растворителя и в) размытой кристаллической решеткой конденсата растворителя. «Мы должны, — писал Н. С. Курнаков, — считать растворы и вещества переменного состава или сольваты основным типом химических превращений»<sup>10</sup>. Бертоллидные системы стали поэтому предметом исследования не столько структурной химии, сколько химической кинетики.

<sup>7</sup> См. Р. С. Карпинская Проблема целостности и молекулярная биология. «Вопросы философии», 1969, № 10.

<sup>8</sup> См. Н. К. Серов О диахронической структуре процессов. «Вопросы философии», 1970, № 7.

<sup>9</sup> См. А. М. Бутлеров Соч., т. 1, стр. 385.

<sup>10</sup> Н. С. Курнаков Избранные труды, т. 1, М. Л., 1960, стр. 37.

Дальнейшая эволюция понятия структуры в химии связана с возникновением понятия структурного уровня. Современная химия изучает по крайней мере три структурных уровня вещества: молекулярную структуру макроскопических тел (газов, жидкостей, кристаллов), атомную структуру молекул и других химических частиц и, наконец, электронно-ядерную структуру атомов и молекул. Молекулярная структура макроскопических тел исследовалась главным образом в физике. Она нашла выражение, в частности, в функциях распределения статистической механики. Электронно-ядерная структура атомов изучалась совместно и в физике и в химии. Так называемые электронные теории органической химии (Льюиса, Робинсона, Инголда и др.) рассматривали электрон как некоторую особую единицу химического состава. Фактически же это структурные теории химии, к которым добавлены «электронные» постулаты. Оперировав представлением об электроне в молекуле, авторы электронных теорий интерпретировали те физические свойства веществ, которые не были понятны с точки зрения химического строения.

Принципы электронной структуры вещества фиксируются квантовой механикой. Эту структуру принято считать фундаментальной для химии. Это значит, что атомно-молекулярные структуры, которые традиционно изучались химией, могут быть поняты как ядерно-электронные структуры, описываемые квантовой механикой. Однако такая возможность реализуется не полностью. Квантовая механика строго описывает только наиболее элементарные электронные структуры: электронный осциллятор, жесткий ротатор, водородоподобный атом и т. д. Точный расчет структурных характеристик систем, содержащих более двух частиц, оказывается пока невозможным. Квантовая механика указывает лишь принцип построения таких систем. Чтобы описать интересные химии электронно-ядерные структуры, приходится прибегать к различным приближенным методам и к соображениям, почерпнутым из структурных теорий классической химии. «У физиков есть привычка брать простейший пример какого-то явления и называть его «физикой», а примеры посложнее отдавать на растерзание других наук, скажем, прикладной математики, электротехники, химии или кристаллографии»<sup>11</sup> За последнее время возник ряд квантово-химических структурных теорий: теория молекулярных орбиталей, теория электронного газа, теория поля лигандов и т. п.

Современная химия дифференцирует по различным уровням и реакционную способность вещества. Теперь говорят о реакционной способности макроскопического тела, о реакционной способности комплекса, молекулы и даже отдельных фрагментов молекулы. Естественно стремление рассчитать реакционную способность при помощи квантовой механики: эта теория подводит общий фундамент не только под структурную химию, но и под химическую кинетику. Квантовая механика в принципе способна описать не только взаимодействие электронов в составе молекулы, но и взаимодействие молекул между собой, взаимодействие молекул с полями и т. д. Однако в этой сфере квантовая механика сталкивается с еще более сложной задачей, чем в сфере структурных теорий. Квантовомеханические методы расчета реакционной способности с неизбежностью превращаются в квантово-химические.

Надежды на категорию структуры слишком велики. У химиков эти чрезмерные надежды объясняются успехами структурных теорий в практике органического синтеза. Но роль этой категории склонны преувеличивать не только химики. В работах философского характера можно тоже довольно часто встретить попытки применения этой категории

<sup>11</sup> Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. Фейнмановские лекции по физике, вып. 7. М., «Мир», 1966, стр. 24.

для описания процессов, подобных химическим. И тогда вводятся разновидности понятия структуры, говорится, например, об интенсивной структуре. Однако любая модификация понятия структуры в сторону интенсивности оказывается лишь насильем над ним. Она не помогает познанию сущности систем, если последние не обладают устойчивостью связей. Исследование кинетических систем требует новых понятийных средств, которыми и занимается химическая кинетика.

### Кинетические теории химии и категория организации

Исследование материальных систем, как правило, идет по двум направлениям: от свойств всей системы к ее элементам и, наоборот, от элементов системы к ее свойствам<sup>12</sup>. Взаимодействие этих подходов в физике привело к построению статистической механики, раскрывающей посредством вероятностных распределений ту динамическую картину, которую называют молекулярной структурой вещества. Такие же направления, собственно, определяют развитие и химической кинетики. Однако эта дисциплина в отличие от статистической механики имеет дело преимущественно с неравновесными системами. Это существенное обстоятельство и ограничивает возможности структурного подхода в описании кинетических систем.

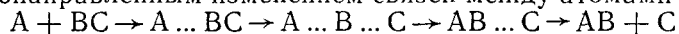
Но ситуация, при которой используется понятие с ограниченными возможностями, может быть лишь временной. Рано или поздно она должна смениться новой ситуацией, характеризующейся появлением новых понятийных средств. Трудности переходного периода между двумя такими ситуациями представляют самостоятельный интерес. Это трудности генезиса категории организации — гомолога категории структуры. Характер этих трудностей виден из примера, иллюстрирующего развитие кинетических исследований.

Первые исследования в области кинетики химических реакций носили феноменологический характер: они устанавливали зависимость между макроскопическими переменными кинетической системы — температурой, давлением, концентрацией реагирующих веществ и т. д. В этих исследованиях широко использовались методы термодинамики, при помощи которых удавалось получать характеристические константы, указывающие на направленность химического процесса и являющиеся мерой реакционной способности веществ. Однако применение традиционной термодинамики для изучения химических процессов оказалось также ограниченным из-за неравновесного характера исследуемых систем. Термодинамические характеристики не дают скорости приближения к равновесию; они указывают лишь на степень отклонения системы от положения равновесия. Поэтому уже в работах Вант-Гоффа, предложившего естественную классификацию химических процессов, феноменологический анализ связывается с молекулярным механизмом реакций. Цель молекулярного подхода состояла, однако, в том, чтобы истолковать макроскопические свойства системы реагирующих веществ на основе их молекулярной структуры и выразить, таким образом, специфические характеристики динамической системы через молекулярные константы.

Дальнейший прогресс в химической кинетике связан с введением постулатов о неустойчивых активных промежуточных продуктах реакции, для характеристики которых потребовался уже синтез динамических и структурных представлений. Одним из наиболее важных постулатов такого рода было положение С. Аррениуса об активных молекулах; оно связывало макроскопический показатель процесса — константу скорости реакции — с очень своеобразной структурно-кинетической характеристикой реагирующих веществ — энергией активации. Представле-

<sup>12</sup> См. Ю. В. Сачков. Познание материальных систем и вероятность. «Вопросы философии», 1963, № 11.

ниями о промежуточных продуктах реакции, именуемых активными комплексами, или активным состоянием, оперирует большинство современных кинетических, в том числе и каталитических, теорий. При этом под активным комплексом — переходным состоянием — понимается в высшей степени интересный феномен: и процесс и предмет одновременно — химическая частица, например, АВС, с непрерывным и строго однонаправленным изменением связей между атомами



и временем жизни всего-навсего около  $10^{-13}$  секунд. Химическая кинетика призвана определить закономерности образования, трансформации и разрушения этого комплекса на основе представлений о структуре исходных реагентов. Для описания же самого комплекса переходного состояния она вводит понятие конфигурации, являющееся тоже своего рода переходным между понятием структуры, отражающим предметность, и неким новым, более емким понятием, которого пока нет, но которое должно отразить динамику взаимодействия всех компонентов кинетической системы.

В связи с тем, что эта система представляет собой некий кинетический континуум, в котором происходит взаимодействие всех компонентов реакции — одного или нескольких реагентов, катализаторов, примесей, растворителя, стенок сосуда, — химическая кинетика рассматривает взаимодействие как частиц одного структурного уровня (молекула + молекула; молекула + свободный радикал), так и систем, принадлежащих к разным структурным уровням (молекула + электрон; молекула + стенка сосуда). Кинетический же анализ систем реагирующих веществ состоит в выявлении и определении соотношения очень многих факторов, влияющих на ход реакции; сюда относятся и термодинамические факторы, и пространственные, и структурные, и массовые (концентрация). Таким образом, химическая структура в системе реагирующих веществ рассматривается лишь в качестве одного из кинетических факторов.

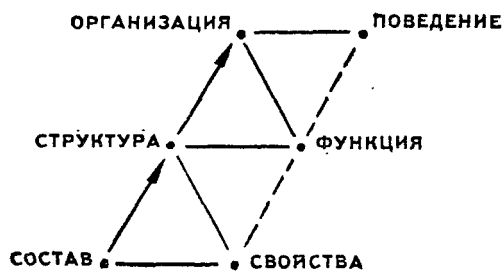
Однако если понятие структуры для характеристики всей кинетической системы в целом оказывается неприемлемым, то какое же понятие в данном случае может его заменить? И нужно ли вообще такое новое понятие? Известно, что в настоящее время как в структурных, так и кинетических теориях широко применяются принципы и методы квантовой механики и статистической физики. Дальнейший прогресс учения о химических процессах идет в этом направлении, и надо всячески развивать методы физической интерпретации элементарных актов химических процессов, чтобы глубже проникнуть в их сущность. В то же время, очевидно, нельзя ожидать, что химик всегда найдет в физических теориях надлежащие понятийные средства для решения задач, относящихся к высокоорганизованным химическим системам. А вся суть дела именно в высоте организации кинетической системы. До тех пор, пока она представляется как некая суммативная система, в которой ради простоты или из-за отсутствия необходимых возможностей познания недоучитывается влияние стенок, примесей, а иногда и растворителей, никакие новые понятия для ее целостной характеристики не нужны.

Но такой подход к кинетическим системам является, конечно, временным. Он чреват серьезными последствиями при его применении в химической практике: из-за недоучета отдельных элементов системы блестящие лабораторные результаты оказываются неудовлетворительными при перенесении в промышленность. Временным он является и потому, что открываются новые средства познания сложных систем именно как органически целостных. Навстречу «физикализации» химии идет обобщение каталитического опыта живой природы, «биологизация», если угодно, что открывает новые перспективы в изучении кинетических систем как частного случая высокоорганизованных каталитических систем. А



это обстоятельство диктует необходимость перехода к новой категории, которая способна характеризовать любую кинетическую и каталитическую систему как целостность, как систему более высокого уровня организации. Собственно, в химии уже сделан такой шаг: появились теории, широко оперирующие понятием организации<sup>13</sup>.

Это означает, что в познании химизма можно заметить гомологический ряд понятий:



соотношение которых определяет последовательность различных концептуальных систем химии.

Познание кинетических систем приводит, по нашему мнению, к понятию об их химической организации. К этому понятию мы вынуждены были прибегать и ранее<sup>14</sup>. Химическую кинетику в наши дни обычно определяют как учение о механизме реакций и о протекании химического процесса во времени. Это определение включает два аспекта: феноменологический и молекулярный. Понятие химической организации, в сущности, объединяет оба этих подхода к химическим системам: с одной стороны, оно отражает упорядоченность этих систем, их механизм; с другой стороны, подчеркивает, что эта упорядоченность является подвижной, неустойчивой, ибо максимальная устойчивость свойственна равновесным системам. В то же время это понятие стимулирует развитие как микрокинетического, так и феноменологического подходов. Ввиду того, что понятие химической организации предполагает описание системы как целостности, его функции важны в замене аддитивного подхода квантовомеханическим способом оценки взаимосвязей элементов и подсистем, в определении соотношения «сильных» и «слабых» взаимодействий — межатомных, межмолекулярных, хемосорбционных и иных связей. Феноменологический же подход при этом стимулируется требованием отражения всего механизма взаимодействия элементов (молекул, стенок сосуда, растворителей и т. д.) в макропоказателях поведения системы.

Понятие функции в связи с этим раскрывается через понятие поведения. Притом чем выше степень организации системы, тем больше нагрузки несет понятие поведения, ибо открытая система приближается к выполнению функций саморегулирования и саморазвития. Последние открытия в области катализа (Г. К. Борескова, А. Гуотми и Р. Каннингема, А. П. Руденко и др.) показывают, что любые реакции «классического» катализа мы можем точнее описывать именно с этих позиций, принимая в расчет самонастройку катализаторов применительно к требованиям системы.

<sup>13</sup> См., например, А. П. Руденко. Теория саморазвития открытых каталитических систем. М., 1969.

<sup>14</sup> См. В. И. Кузнецов. Новое в представлениях о дискретности и непрерывности химической организации вещества. «Вопросы философии». 1963, № 10.

Рассматривая понятие химической организации, нельзя умолчать о некоторых тенденциях современного мышления, заключающихся во все более широком включении в концептуальный арсенал науки понятия организации<sup>15</sup>. Это понятие воспринято рядом междисциплинарных теорий, таких, как кибернетика, общая теория систем и т. д. Физика, очевидно, находится еще на подступах к нему. Во всяком случае, тенденцию к познанию физической организации вещества можно заметить в таких физических дисциплинах, как термодинамика необратимых процессов и физическая кинетика, которые не удовлетворяются функциями распределения, характеризующими структуру макроскопических тел. Чтобы проследить то, что происходит при отклонениях от термодинамического равновесия, приходится, так сказать, «перебирать атом за атомом»<sup>16</sup>.

Что же такое «организация»? Эта категория разработана меньше, чем категория структуры. Многие авторы отмечают, что организация так же, как и структура, выражает определенную упорядоченность системы. Однако организация — более широкое и емкое понятие. «Организация,— пишут М. Ф. Веденов и В. И. Кремьянский,— может быть нестабильной, тогда как понятие структуры отображает лишь наиболее устойчивые, инвариантные в преобразованиях проявления данной упорядоченности отношений и связей между тоже устойчиво выделенными элементами образования или актами процесса его деятельности»<sup>17</sup>.

Организация, как и структура, включает по крайней мере два аспекта — аспекты частей и связей. Однако частями организации могут являться объекты, принадлежащие к различным структурным уровням, например: свободный атом и молекула, молекула и клетка. Более того, один и тот же объект может выступать в некоторой организации и как элемент, то есть соотноситься с другими частями организации, и как бесструктурное образование, и как структура (например, завод в составе отрасли производства рассматривается и как производственная единица и как производственная структура).

Внутренние связи организации подразделяются на стабильные и лабильные<sup>18</sup>. Первые сохраняются в данной системе, вторые придают ей подвижность, вариантность. Нестабильные связи определяют непрерывность изменений системы, эволюцию ее организации. С ними связаны такие категории организации, как динамическая устойчивость, прибавочная энергия или прибавочная работа. «По сути дела, эти физические показатели выражают не что иное, как меру возрастания организации, рассматриваемой в аспектах ее антиэнтропийного действия»<sup>19</sup>.

Приведенная выше схема (см. стр. 54) отражает путь постепенной «динамизации» научных понятий (от понятия состава к понятию организации). Она указывает общую тенденцию научного познания, которая проявилась в соотношении кинетических и структурных теорий. «Надо сначала знать, что такое данный предмет, чтобы можно было заняться теми изменениями, которые с ним происходят»<sup>20</sup>,— говорил Энгельс. И в этом состоит «великое историческое оправдание» старого метода исследования и мышления, который оперировал преимущественно предметами как чем-то законченным и неизменным и остатки которого до сих пор еще сохранились в сознании исследователей.

<sup>15</sup> См. Л. фон Бергманн. Общая теория систем: критический обзор. В кн. «Исследования по общей теории систем». М., «Прогресс», 1969, стр. 26.

<sup>16</sup> Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. Фейнмановские лекции по физике, вып. 4 М., «Мир», 1965, стр. 82.

<sup>17</sup> М. Ф. Веденов, В. И. Кремьянский. К анализу общих и биологических принципов самоорганизации. Сб. «Системные исследования». М., «Наука», 1969, стр. 141.

<sup>18</sup> См. И. Клир. Абстрактное понятие системы как методологическое средство. В сб. «Исследования по общей теории систем». М., «Прогресс», 1969.

<sup>19</sup> М. Ф. Веденов, В. И. Кремьянский. Цит. соч., стр. 143.

<sup>20</sup> К. Маркс, Ф. Энгельс, Соч., т. 21, стр. 303.

По нашему мнению, с помощью концепции химической организации вещества может быть произведена некоторая систематизация эмпирического и полуэмпирического материала химии. Одним из приложений этого понятия является классификация химических систем, работа над которой начата одним из нас<sup>21</sup>, и теория химической эволюции, которая интенсивно развивается в последние годы.

Мы выделяем три основные формы химической организации вещества: дальтонидную, бертоллидную и переходное состояние. Дальтонидная форма включает химические соединения, первичными частицами которых являются закрытые системы — молекулы или молекулоподобные частицы типа радикалов, сложных ионов и т. д. Свойства и реакционная способность этих соединений в значительной степени определяются их структурой. Так как подавляющее большинство органических соединений относится к дальтонидной форме организации вещества, эти соединения с достаточной полнотой описываются структурными теориями.

В то же время в современной химии наметилась тенденция к кинетическому переосмыслению и уточнению многих положений структурных теорий. Такая тенденция вполне соответствует логике предмета этой науки: категория организации как высший гомолог включает категорию структуры так же, как категория структуры включает категорию состава. Кинетические теории позволяют химикам рассматривать любые формы химической организации вещества в их взаимодействии, не односторонне, а с учетом присущего им единства статичности и динамичности, структурной инвариантности и неустойчивости как стимула к изменениям. Здесь нельзя не вспомнить прогноз А. М. Бутлерова. «Рациональнее всего допустить, — говорил он, — что в дальнейшем развитии химии, с уяснением динамических отношений в химических соединениях, теория химического строения (как менее общая) войдет, как часть, в химическую динамику...»<sup>22</sup>. Такой момент наступил: навстречу структурным теориям сейчас идут кинетические теории.

<sup>21</sup> См. В. И. Кузнецов. Эволюция представлений об основных законах химии. стр. 242.

<sup>22</sup> А. М. Бутлеров. Соч., т. 1, стр. 605.